DLRO, ODLRO と 超 流 動

名大理　長 岡 洋 介

(2月 4日受理)

1。多体系に生じる長距離秩序にはDiagonal Long-Range Order (DLRO) とOff-Diagonal Long-Range Order (ODLRO) との区別があり，超流動は後者で起きて前者では起きないというのが，Yang[1]以来の通説であった。何故DLROのときには超流動が起きないかを，KohnとSherrington[2]は励起子相の場合についてつぎのように説明している。励起子相の凝縮は，形式的には超伝導の場合と同じように書けるが，そこで凝縮を起こすのは電子とホールの対であって，超伝導の場合のような電子対ではない。電子とホールの対がいくら流れても電子の流れにはならず，したがって超流動にはならないというのである。

しかし，最近になってPeierls転移を起こして格子に密度波の生じた状態は超伝導性を持つとするBardeen[3]らの議論，高密度励起子系において励起子がボース凝縮するとエネルギーの超流動が起こるという花村さん[4]らの議論が出て，ODLRO-超流動と結ぶ通説の根拠を検討し直す必要が(少くとも私にとって)出て来た。たしかに，Kohn-Sherrington の議論は励起子相で粒子の流れに超流動が起きないという説明にはなっていても，花村さんらのように超流動の概念を一般の物理量にまで広げたときそれが起きないという説明にはなっていない。

この小論では，この問題についての私なりの考えを述べたい。結論は，やはり超流動は一般の物理量に拡張した意味でもDLROでは起きないというものである。そんなこと当り前ではないかという声も聞こえてきそうな気がするが，少くとも私にとっては最近考えてみるまではあまり当り前ではなく，またこれまで以下のような説明を聞いたことがないので，あえて書いてみる次第である。ご批判，ご教示をいただければ幸いである。

2. まずODLRO とはどういうものか簡単に復習してみる。ボース粒子系と引力の働くフェルミ粒子系でODLRO が起きるわけであるが，その秩序パラメータはボース粒子系では量子化された波動関数Ψの平均値$\langle \Psi \rangle$であり，フェルミ粒子系では粒子対の平均値$\langle \psi\psi \rangle$ である。このマクロの波動関数をΨで表す。すると，系のハミルトニア

ンがゲージ変換に対して不変であるという対称性の反映として，凝縮相のエネルギーはΨの位相χに依存しないことになる。すなわち，凝縮相は位相χの分だけ連続的に縮退しているのである。もちろん，波動関数の位相そのものの値には意味がない。しかし，位相差には意味があるのであって，例えば，弱く結合した二つの超伝導体の間には，両者のΨに位相差があればそれに伴うJosephson 電流が流れる。χが空間的に連続的に変化しているときには，$\nabla\chi$が超流動速度を与えるのである。

このように見るとき，ODLROが超流動をもつのには，系のハミルトニアンがゲージ変換という連続的な対称性を持つこと，それに伴い凝縮相は位相という連続的な縮退を持つことが，基本的な役割を果していることがわかる。[*)]

しかし，励起子相の問題のように，DLRDを起こす系の問題が，形式的にはODLROを起こす系と全く同等になる場合がしばしばある。上記の例も含めて，そのような場合を列挙するとつぎのようになる。

1) 励起子相，および高密度励起子系における量子凝縮の問題は，下のバンドにできるホールを粒子と見なすことにすれば，超伝導における粒子対の量子凝縮と同等になる。しかし，ホールを粒子と見なすことをしなければこれは DLRO であって，波数q の励起子の凝縮は波数q の密度波の発生を意味している。[2)] q＝0の場合はあとで論じる。

2) ボース粒子の格子ガス模型は，異方的な交換相互作用を持つスピン系と同等である。[6)] 前者で格子点に粒子があるかないかが，後者でその格子点のスピンが上を向くか下を向くかに対応している。格子ガスの量子凝縮はスピン系のXY 面内における反強磁性的な配列に対応する。

3) 電子系のHubbard 模型において，バンドがある特殊な構造をしていて，かつ電子数が格子点の数に等しい場合(Half-filled)，下むきスピンの電子について電子とホールを入れかえて記述することにより，相互作用が斥力の場合と引力の場合が同等になることが示される。[7)] 前者では反強磁性(DLRO)が，後者では超伝導(ODLRO)が生じる。

探せばこのほかにもいろいろ例を見つけることができるであろう。

さて，上記のような例においては，DLROを起こす系とOLDRO を起こす系がある種のユニタリー変換で結ばれる数学的に全く同等なものである。ODLROを起こす系の秩序相は，系のゲージ不変性を反映して位相についての連続的な縮退を持つことはすでに述べた。ということは，これと同等なDLRO を起こす系も，ある種の連続的な対称

---

*) これは超流動が生じるための必要条件ではあるが十分条件ではない。例えば，相互作用のないボース粒子系は，ボース凝縮しても超流動にはならないことがよく知られている。[5)]

性を持ち，その対称性を破って生じた秩序相は対称性を反映した連続的な縮退を持つことを意味する。上記の例のおのおのについてこの連続的な対称性を見出すことは容易である。それは，励起子相（$q \neq 0$）の問題では並進対称性であり，スピン系ではスピン空間の回転である。ODLROにおけるマクロ波動関数の位相に対応するものは，励起子相では密度波の位相であり，スピン系の反強磁性では副格子磁化のむきである。

さらに，ODLROでは粒子の流れ J_N が超流動を起こすことが知られている。ということは，これと対応したDLRO においても前者の粒子数に対応したある物理量の流れ，J_α に超流動が生じることを意味している。このある物理量とは，励起子系では励起子のエネルギーであり，スピン系ではスピン角運動量であろう。

このように，ODLRO とDLRO との間には数学的な区別を見出すことはできない。差は物理量との関係にのみ見出されるのである。超流動の概念を粒子の流れに対してのみいうのでなく，一般の物理量にまで拡張すれば，ユニタリー変換によってODLROを起こす系に対応させることのできる系のDLRO 状態において超流動が生じるのは自明であるといってよい。

ここでODLROの場合のゲージ不変性と超流動との関係を思いおこすと，このDLROが超流動を起こす場合にも，その系の持つ連続的な変換に対する不変性と，それを反映した秩序相の連続的縮退が必要条件となることは明らかであろう。この先は一般的な証明があるわけではないが，おそらく特殊な例外を除けば，連続的な対称性を持つ系にその対称性を破って生じた秩序相には必ず超流動が起こるのではあるまいか。なにもゲージ変換に限った話ではなく，連続的な変換でさえあればなんでもよいのである。

3．それでは液体が固まって結晶ができる場合はどうか。ここでは系の持つ並進対称性が破れる。これはもちろん連続的な変換だから，結晶もまた超流動するのであろうか？答は，しかり。われわれは並進対称性のある場合を考えているのだから，重力も摩擦力も働いていない場合を考えているのである。この場合には，結晶をちょっと押せば結晶はいつまでも動きつづけるであろう。これはニュートンの慣性の法則にすぎない。

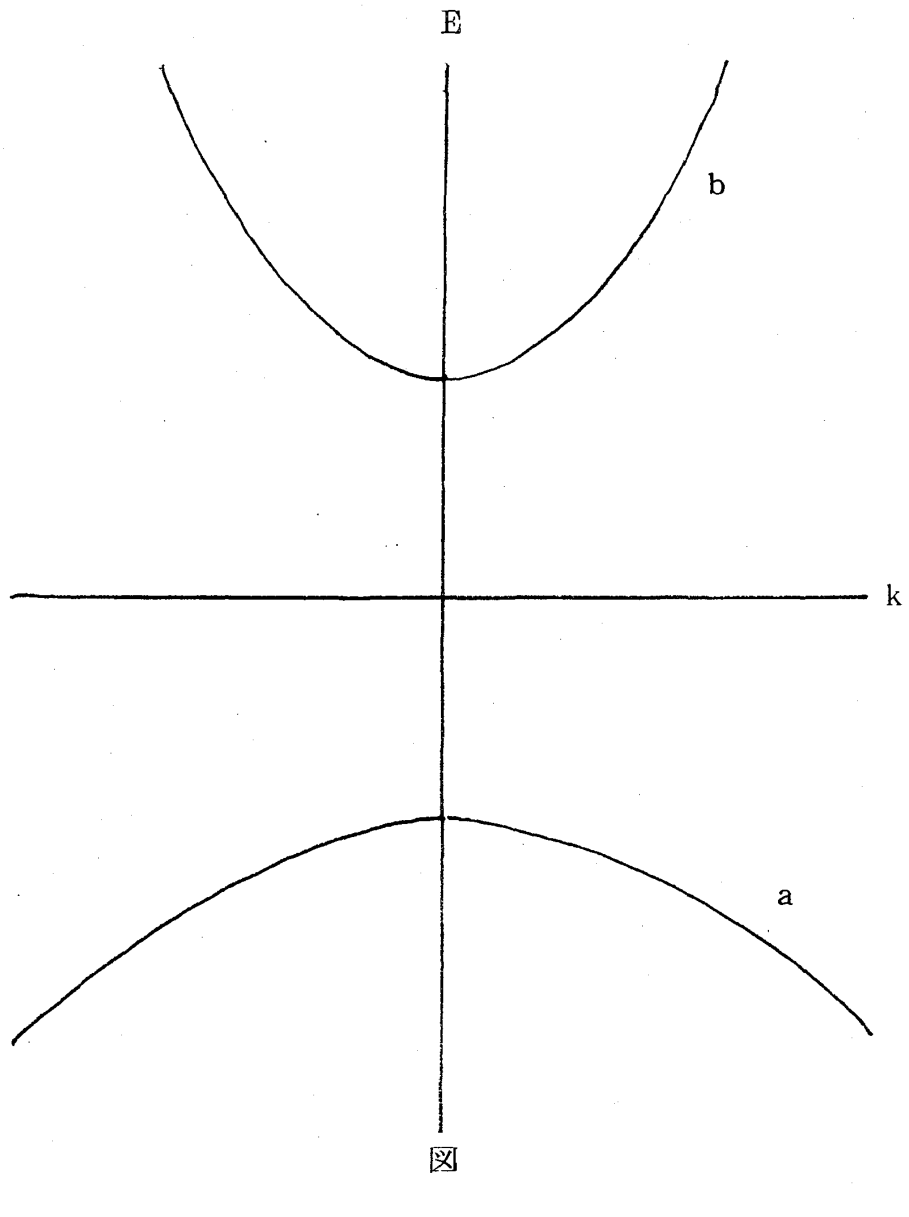
話がここまで来ると，そんな馬鹿な ── ということになろう。現実には重力が働き摩擦力が働いているのだから，ちょっと押すだけでは結晶は動かず，決して超流動は起こさないのである。いいかえれば，現実の系は決して並進対称性を持たないのである。

これでDLRO は超流動を起こすとかいう問いにほぼ答は出たと思う。話は，このように馬鹿げた場合でなくても本質的には同じである。現実のスピン系には異方性エネルギーがあり，磁化容易軸が(100)とか(111)とかに決っている。スピン空間の連続的

な回転対称性は存在せず，あるのは(100)から(010)へのような不連続な回転に対する対称性にすぎない。いかに異方性エネルギーが小さくても，スピンが長距離秩序をつくってしまえば，スピンのむきを容易軸に止めておくエネルギーはマクロな大きさになり，スピンは熱的なゆらぎによってむきを変えることはできない。

密度波の場合は，その波長が格子間隔と有理比になっている場合(commensulate)には，密度波の山がイオンの位置にくるのがよいか，イオンの間隙にくるのがよいか，エネルギー的に一番有利な位置が決ってしまい，密度波の位相は固定される。

$q=0$の励起子が凝縮する場合はちょっとわかりにくいので，少し詳しく考えてみる。簡単のため縮退のない二つのバンドa，b(図)を考え，電子のスピンは無視して，各バンドの電子の生成・消滅演算子を a_k^+, a_k, b_k^+, b_k で表わす。波数qの励起子の生成



図

演算子を，フレンケル型の極限を考えることにして

$$A_q^+ = \sum_k b_{k+q}^+ \, q_k$$

とする。q＝0の励起子が凝縮した状態では

$$\langle A_0^+ \rangle = Ae^{i\chi} \neq 0$$

が秩序パラメータとなる。この状態で電子密度を調べると，二つのバンドの原子軌道を $\phi_a(r)$，$\phi_b(r)$ として，簡単な計算から単位胞内で

$$\langle \rho(r) \rangle = (1-n)\,\phi_a(r)^2 + n\phi_b(r)^2 + 2A\cos\chi\,\phi_a(r)\,\phi_b(r)$$

$$n = \frac{1}{N}\sum_k \langle b_k^+ \, b_k \rangle$$

が得られる。ここでは tight bindingの近似をつかっている。この結果で注目したいのは，電子密度が位相 χ に依存することである。すなわちq＝0の励起子の凝縮とは，実は単位胞内における電子分布の変化を意味するのである。独立の励起子のボース凝縮という簡単化の際に落された電子間相互作用を考慮すれば，この凝縮相のエネルギーが位相 χ に依存するようになることは明かであろう。実際の凝縮はエネルギー的に最も有利な χ を選んで起こるはずであり，凝縮相に位相 χ についての縮退はない。

波長が格子間隔と有理比にない密度波が生じる場合（incommensulate）はさらにわかりにくい。この場合のことはPeierls転移に関連してLee−Rice−Anderson[8] によって論じられているが，ここでは少し角度を変えて考えてみる。この場合は，結晶が全く完全であれば，凝縮相のエネルギーは位相に依存しなくなる。しかし，現実の結晶はつねに不完全なものである。例えば不純物がランダムに分布していたとする。不純物と密度波との相互作用が強ければ，密度波は局所的に波長を変えてでもエネルギー的に有利な位置をつくって落着くことになるであろう。（Lee−Rice−Anderson はこのようになる可能性を指摘している。）しかし，相互作用が弱いときには，密度波の長距離秩序が不純物によって乱されない場合も起こるように思われる。そのような場合を考えると密度波と不純物の相互作用エネルギーは

$$E_{imp} = V\sum_i \rho(R_i)$$

$$= V\rho_0 \sum_i \cos(qR_i + \chi)$$

となるであろう。Vは1個の不純物との相互作用のエネルギー，ρ_0は密度波の振巾，q は波数，χは位相である。不純物の位置 R_i がランダムに分布しているとして平均すると，E_{imp}は0になってしまう。しかし，不純物の分布のゆらぎを考慮すると

$$< e^{iqRi} > \sim \sqrt{Ni}\ e^{i\alpha}$$

（Ni は不純物の数）となるから

$$E_{imp} \sim V\rho_0\sqrt{Ni}\cos(\alpha+\chi)$$

である。相互作用のエネルギーは位相に依存する。密度波は E_{imp} = Min のエネルギー的に一番有利な位置に生じることになる。密度波の位相を止めるエネルギーは $\sqrt{Ni}$ に比例するから，原子1個当りにすれば非常に小さいが，全体としては原子的なスケールに比べて非常に大きく，熱的なゆらぎでは乗り越えることはできない。

4．以上を要約すればつぎのようになる。

DLRO を起こす系でも，理想化，簡単化された場合を考えると，厳密に連続的な対称性を持つことがある。このような系でこの対称性が破れてDLRO 相が生じたときには，そこである種の物理量に超流動が起こる。しかし，現実の系では，種々の複雑な相互作用や不完全さが存在しており，それによって連続的な対称性は失われ，超流動は起こりえないことになる。

ひるがえって，ODLRO の場合はどうであろうか。ゲージ不変性は一般の物理系に厳密に要求される対称性であり，したがって，現実の系にどのように複雑な相互作用，どのような不完全さが存在していても，それによってゲージ不変性が失われることはない。したがって，ODLRO の秩序相ではつねに位相についての連続的な縮退があり，超流動が起こるのである。現実の系を考えたとき，はじめてDLROとODLRO の差異がはっきりするのである。

一般論はこれでおしまいである。しかし，各論をやりだすと話はつきない。前節であげた例だけについても位相がピン止めされる機構は種々様々であった。それぞれの場合にいろいろ面白いことが期待されるであろう。密度波が不純物で止められる場合，止める力は $\sqrt{Ni}$ に比例する小さいものにすぎないから，ほんのちょっとの力で密度波は動き出すかも知れない。その流れにおけるエネルギー散逸の機構は，摩擦力の場合と同じように非線形なものとなるであろう。アモルファスな磁性体においては異方性エネルギーの効果はどうなるであろうか。[9] さらに，液体強磁性体がもしあったとしたら，その場

合はどうか。[10]高密度の核子系で起こると考えられているπ凝縮[11]の場合は，このDLROの超流動を止める力は境界にしか存在しないように思われる。したがって，π凝縮を起こした状態が超伝導か否かの議論をするとき，完全な並進対称性をもつ無限系についていくら考えても意味がないのではあるまいか。

この小論を書くに当って山内淳氏（名大理）との議論に負うところが大きかった。とくくに3節における議論の基礎に山内氏の計算結果を二，三つかわせていただいた。氏に感謝の意を表したい。

参考文献

1) C. N. Yang : Rev. Mod. Phys. 34 (1962), 694.
2) W. Kohn and D. Sherrington : Rev. Mod. Phys. 42 (1970), 1.
3) J. Bardeen, Solid State Commun. 13 (1973), 357. 9 (1974), 639.
4) E. Hanamura and H. Haug, Solid State Commun. 15 (1974), 1567.
5) いわゆるランダウの条件については，ランダウ・リフシッツ：統計物理学（上），第6章，別の立場からの議論として，T. Izuyama : preprint.
6) T. Matsubara and H. Matsuda : Progr. Phys. 16 (1956), 410.
7) Y. Nagaoka : Progr. Theor. Phys. 52 (1974), 1716.
8) P. A. Lee, T. M. Rice and P. W. Anderson : Solid State Commun. 14 (1974), 703.
9) たとえば，
R. Harris, M. Plischke and M. J. Zuckermann : Phys. Rev. Letters 31 (1973), 160.
10) P. G. de Gennes and P. A. Pincus : Solid State Commun. 7 (1969), 339.
11) A. B. Migdal : Nuclear Phys. A210 (1973), 421.
R. F. Sawyer : Phys. Rev. Letters 31 (1973), 1556.